



TITLE:

1.LiNbO<sub>3</sub>の複屈折と強誘電性(早稲田大学大学院理工学研究科物理学及び応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度))

AUTHOR(S):

八木, 均

---

CITATION:

八木, 均. 1.LiNbO<sub>3</sub>の複屈折と強誘電性(早稲田大学大学院理工学研究科物理学及び応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1988年度)). 物性研究 1989, 52(6): 732-732

ISSUE DATE:

1989-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93710>

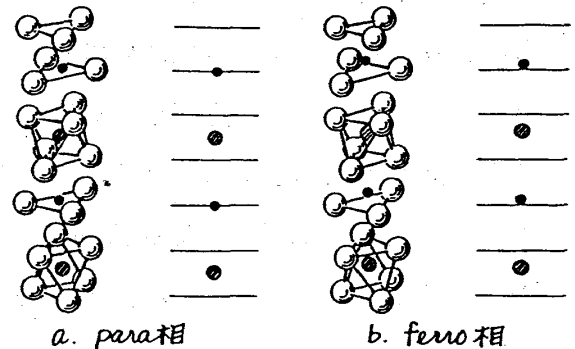
RIGHT:

1.  $\text{LiNbO}_3$  の複屈折と強誘電性

八 木 均

$\text{LiNbO}_3$  は三方晶系に属する強誘電体である。相転移点  $T_c = 1210^\circ\text{C}$  を境に、高温側の para 相では空間群  $D_{3d}$ 、低温側の ferro 相では空間群  $C_{6v}$  に属する。両相での結晶構造は図1に示す通りである。

結晶引き上げ法で、大形・良質の単結晶育成が可能になり、物性の測定が盛んに行われ、また、光エレクトロニクス技術の発達に伴い、この物質の示す非線形的性質 (SHG 発生等) も用いて、様々な応用がなされている。ここでは、基礎的物性である複屈折  $\Delta n$  を微視的な立場から、双極子モデルを用いて説明することと試みに、

図1:  $\text{LiNbO}_3$  の結晶構造

以前の議論では、全ての酸素が同じ分極をし、また、

$\text{Li}$ ,  $\text{Nb}$  両イオンが変位していない構造 (para 構造) をとると仮定した。これに対し、今回の研究では、結晶構造からみて、酸素には数種類の分極があると考え、また、構造も ferro 構造そのものとする。

各々のイオンの電子分極率を、 $\alpha_o = 2.394 (\text{\AA}^3)$ ,  $\alpha_{\text{Li}} = 0.03 (\text{\AA}^3)$ ,  $\alpha_{\text{Nb}} = 0.35 (\text{\AA}^3)$  とし、

$$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial E} = \epsilon_i(\omega_c) = \sum_j \rho_j + E_{\text{ex}} \quad (i, j = 01, 02, 03, \text{Li, Nb})$$

$$P = \frac{1}{V_{\text{unit}}} \cdot \sum_i C_i \rho_i E_{\text{ex}} \quad (C_i: \text{単位胞内の双極子 } \rho_i \text{ の個数})$$

$$n^2 = \epsilon = \frac{D}{E_{\text{ex}}} = \frac{E_{\text{ex}} + 4\pi P}{E_{\text{ex}}} = 1 + 4\pi \frac{P}{E_{\text{ex}}}$$

より、屈折率  $n$  と複屈折  $\Delta n = n_e - n_o$  を求めると、図2, 3に示す結果が得られた。これを見ると、全温度領域で  $\Delta n > 0$  である。そこで、自発カー効果 (自発分極による大まな局所場によって、分極軸方向の電子分極率が減少する効果) による電子分極率の異方性を考える。Slater 型軌道関数を用いると、例えば、 $\text{Nb}$  イオンの電子分極率は、分極軸方向では、 $\alpha_{\text{Nb}} = 0.35 (1 - 7.3736 \times 10^{-16} E_{\text{Nb}}^2) (\text{\AA}^3)$  となる。これにより、 $n_e$  が減少し、低温領域では  $\Delta n < 0$  になると予想された。

また、イオンのポテンシャル  $U$  を定式化することにより、大まな自発分極  $P_s = 71 (\mu\text{C}/\text{cm}^2)$  (at R.T.) の発現機構についても言及しようと思う。

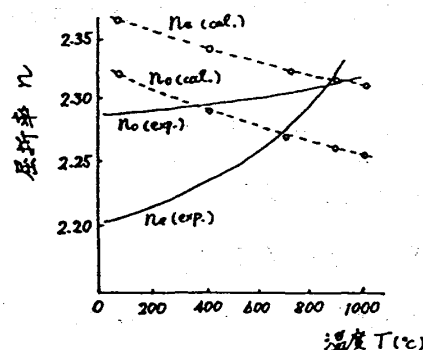


図2: 屈折率の温度変化

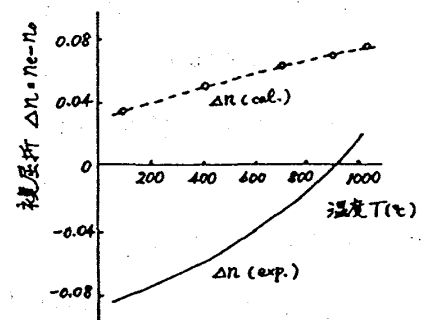


図3: 複屈折の温度変化